



TITLE:

12.液体金属の電子状態の解析的モデル計算(「第2回液体金属の物性と構造に関する研究討論会」,研究会報告)

AUTHOR(S):

末崎, 幸生

CITATION:

末崎, 幸生. 12.液体金属の電子状態の解析的モデル計算(「第2回液体金属の物性と構造に関する研究討論会」,研究会報告). 物性研究 1970, 13(5): 415-418

ISSUE DATE:

1970-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/87261>

RIGHT:

12. 液体金属の電子状態の解析的モデル計算

九大・理 末 崎 幸 生

§ 1. 序

電子の平均自由行程が平均イオン間距離より充分長い場合、即ち Nearly Free Electron (N.F.E.) 近似に基づいた液体金属の電子状態についてはその草分である Ziman¹⁾ 以来、分散、状態密度、電気抵抗などが構造因子 $S(q)$ とポテンシャル $v(q)$ に実験結果や理論値を代入して数値的に計算がなされてきた。²⁾ それらによると定量的にもかなり電気抵抗などを説明できるが、電子のグリーン関数の解析的性質を解明するための解答は得られていない。ここではポテンシャルに簡単な解析関数を仮定したモデル計算を実行したので報告する。特に構造因子 $S(q)$ の第一のピークの中を無限に狭くしていく極限の計算は実際の物質との対応を考えると、非現実的なモデルのような感を与える。然し最近 $p-T$ 相図の融解温度 T_M 極大の点における液体固体の二次相転移の可能性が追求されているが(九大理)この可能性があるとする $S(q)$ に異常な Narrowing が期待され、非現実的でない興味ある問題だと思われる。

§ 2. 計 算

Static で高温近似を行なうと電子の二次の self-energy は

$$\text{X} \text{---} \text{X} = \Sigma(\underline{p}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\underline{q}} |v(q)|^2 S(q) \frac{1}{\omega - \epsilon_{\underline{p}-\underline{q}} + i\delta} \quad (1)$$

(ただし $\hbar=m=1$, $\epsilon_p = p^2/2$)
と表わせる。ここで $S(q)$ は中性子散乱実験の結果を、 $v(q)$ には screened Coulomb 的 pseudo-potential を用いると $v^2(q)S(q)$ は Fig-1 のような形となる。従って $v^2(q)S(q)$ を次の形で simulate することにしよう。

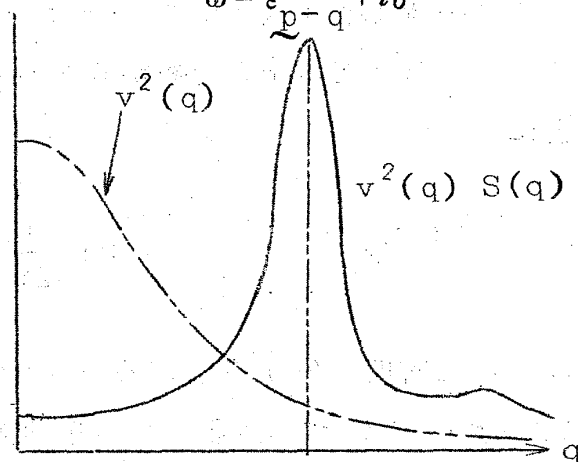


Fig. 1 Rb の $v^2 S$

$$v^2(q)S(q) = \frac{v^2}{\pi} \frac{\beta}{[(q/q_0)^2 - 1]^2 + \beta^2} \quad (2)$$

(2) を (1) に代入して角度積分を実行すると、結局

$$\Sigma(\underline{p}, \omega) = \frac{\hat{\alpha}}{a} \epsilon_{q_0} \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \frac{1}{\pi} \frac{\beta}{(x^2 - 1)^2 + \beta^2} \ell_n \left[\frac{b + 2ax - x^2}{b - 2ax - x^2} \right] \quad (3)$$

$$\hat{\alpha} = \frac{3Z_0 v^2}{8\epsilon_f p_f q_0}, \quad a = p/q_0, \quad b = (\omega + i\delta - \epsilon_p)/\epsilon_{q_0} \quad (4)$$

となる。ここで波数を q_0 、エネルギーを $\epsilon_{q_0} = q_0^2/2$ で scale して無次元の $a, b, \hat{\alpha}$ で無次元の self-energy part $\hat{\Sigma}(a, b)$ を表現すると path integral によって次の表式を得る。

$$\hat{\Sigma}(a, b) = \hat{\Delta}(a, b) - i\hat{\Gamma}(a, b) - i\delta \quad (5)$$

$$\hat{\Delta}(a, b) = -\left(\frac{\hat{\alpha}}{2a}\right) \ell_n \left[\frac{(b-1-\sqrt{2(\sqrt{-1}+1)a})^2 + (\beta+\sqrt{2(\sqrt{-1}-1)a})^2}{(b-1+\sqrt{2(\sqrt{-1}+1)a})^2 + (\beta-\sqrt{2(\sqrt{-1}-1)a})^2} \right] \\ (\sqrt{} \equiv \sqrt{1+\beta^2}) \quad (6)$$

$$\hat{\Gamma}(a, b) = \begin{cases} \left(\frac{\hat{\alpha}}{a}\right) \left[\tan^{-1} \left\{ \frac{(a+\sqrt{a^2+b})^2-1}{\beta} \right\} - \tan \left\{ \frac{(a-\sqrt{a^2+b})^2-1}{\beta} \right\} \right], & a^2+b \geq 0 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (7)$$

$\hat{\Gamma}$ の存在をしばらくおいて $\omega - \epsilon_p - \Delta(p, \omega) = 0$ 、即ち $b - \hat{\Delta}(a, b) = 0$ からきまる b で電子の分散がきまるとすると (6) を用いて Liquid-Zn の場合に

$$N(E)/N_{F.E.}(E) = \left[1 + \frac{1}{2a} \frac{\partial}{\partial a} \hat{\Delta}(a, b) \right]^{-1} \quad (8)$$

から状態密度 $N(E)$ を求めると Fig-2 のようになる。さて次に (6), (7) 式で $\beta \rightarrow 0$ とする極限の場合を考えてみよう。すると (6) 式は

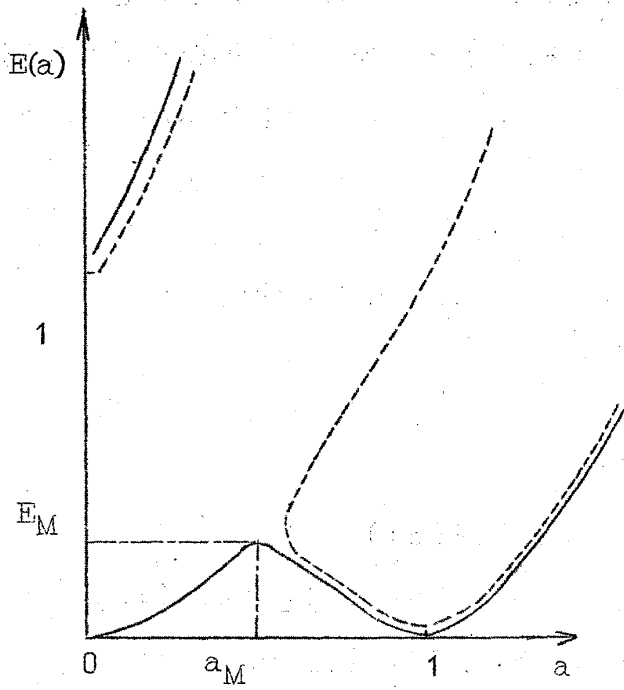


Fig. 3 $\beta \rightarrow 0$ の電子スペクトル

— ; $\hat{\Gamma} = 0$
 - - - ; $\hat{\Gamma} \neq 0$

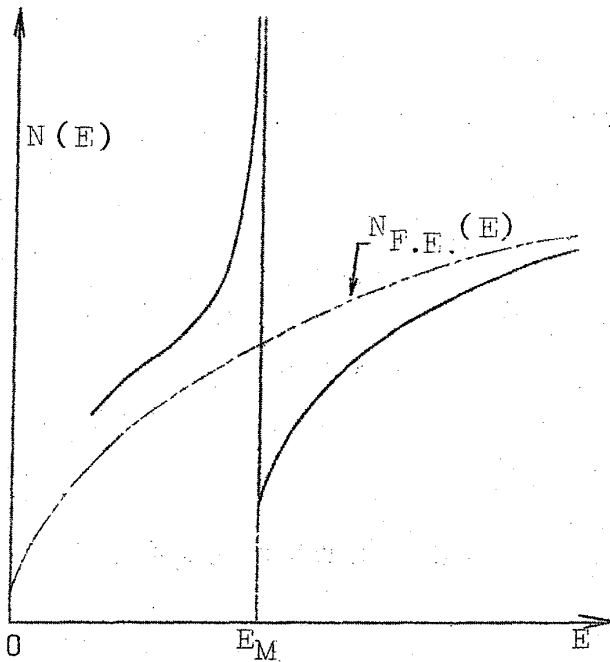


Fig. 4 $\beta \rightarrow 0$ のときの状態密度 ; $N(E)$

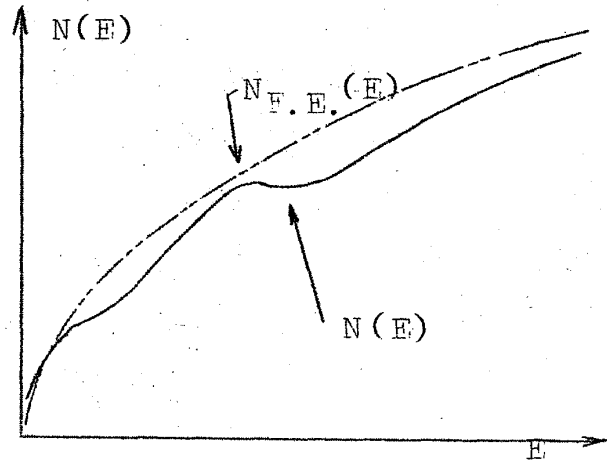


Fig. 2 Z_T の状態密度

$$\hat{\Delta}(a, b) = \left(\frac{a}{b}\right) \ln \left| \frac{b-1+2a}{b-1-2a} \right|$$

となって $b = \hat{\Delta}(a, b)$ の根の軌跡は Fig. 3 のようになり, 自由電子の Branch $E(a) = a^2$ とは大きく異なる。

その後の計算の結果を附記するとこの近似の範囲内での状態密度と Fermi-energy の関数としての Hall 係数

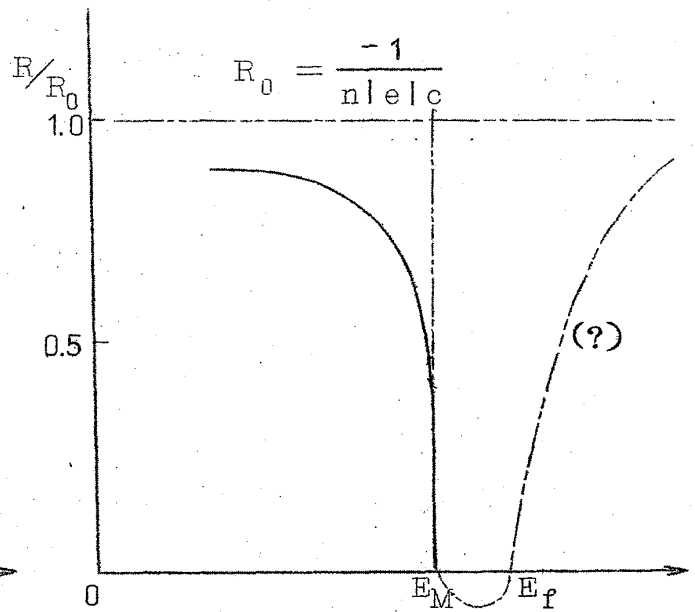


Fig. 5 Fermi energy E_f の関数としての Hall 係数

末崎幸生

を求めると Fig. 4, 5 のようになる。

状態密度に発散が生じたのは波数空間でのスペクトルの異常が固体と異って等エネルギー面で生じて蓄積したためと解釈できる。従って状態密度の自由電子からのすれは液体の方が大きい事があり得るだろう。Hall 係数が $E_f = E_M$ で 0 となるのは $a > a_M$ の Hole-like の Branch の寄与が $E_f \rightarrow E_M$ で同量で符号が逆になるために生じたものであるが, $E_f > E_M$ では Hall 係数の困難があり, この Model この近似を越えなければならず, 今後の問題の一つである。

参 考 文 献

- 1) J.M.Ziman ; Phil. Mag. 6 1013 (1961)
- 2) M.Watabe, M.Tanaka; Prog. Theor. Phys. 31 525 (1964)
- N.W.Ashcroft, J.Lekner ; Phys. Rev. 145 83 (1968)
- L.E.Ballentine ; Can. Jour. Phys. 44 2533 (1966)
- R.W.Shaw, N.V.Smith ; Phys. Rev. 178 985 (1968)

13. 液体金属 Na 中に於ける非金属元素 O, H, C の状態と挙動について

日本原子力研究所 古 川 和 男
勝 田 博 司

§ 1 緒 言

液体金属 Na についての構造と物性の研究は液体金属を研究する上での出発点として多くの研究がなされている。

一方原子力に対する需要と原子力工業の発達に供って高速増殖炉冷却材としての Na が注目され, 液体 Na と構造材料, 化合物燃料との共存性の面からの研究が最近急速に進められ, Na の特性は Na 中に極く微量に存在する不純物,